

**UJI AKTIVITAS ANTIVIRUS DARI SENYAWA KATEKIN
TERHADAP M-PROTEASE SARS-COV 2 SECARA *IN SILICO***

SKRIPSI

**Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana
Farmasi Program Studi S1 Farmasi STIKes Bakti Tunas Husada**

IMAS RATNASARI

31117020



**PROGRAM STUDI S1-FARMASI
SEKOLAH TINGGI ILMU KESEHATAN BAKTI TUNAS
HUSADA TASIKMALAYA
2020/2021**

ABSTRAK

Uji Aktivitas Antivirus Dari Senyawa Katekin Terhadap M-Protease Sars-Cov 2 Secara *In Silico*

Imas Ratnasari

S1 Farmasi, STIKes Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Abstrak

Penyakit coronavirus 19 (COVID-19) adalah penyakit yang sangat menular disebabkan oleh sindrom pernafasan akut yang parah coronavirus 2 (*SARS-CoV-2*). Senyawa bahan alam sering menjadi pilihan yang lebih murah dan aman. Salah satu senyawa bahan alam yang berkhasiat sebagai antivirus adalah katekin. Senyawa katekin mempunyai aktivitas antivirus terhadap *M-Protease SARS-CoV-2*. Namun belum diketahui kestabilannya pada simulasi *molecular dynamic*. Tujuan penelitian ini untuk mengetahui senyawa katekin terbaik yang berpotensi sebagai anti SARS-CoV-2 dan mengetahui kestabilannya. Penelitian ini dilakukan menggunakan metode *molecular docking* dan *molecular dynamic*. Hasil *molecular docking* menunjukkan bahwa senyawa katekin galat dan epikatekin galat memiliki nilai *binding affinity* terendah yaitu -12,44 kcal/mol. Hasil *docking* dengan simulasi *molecular dynamic* terdapat kesamaan asam amino dan ikatan hidrogen. Sehingga dapat disimpulkan bahwa senyawa katekin galat dan epikatekin galat mempunyai aktivitas terbaik terhadap protein target dan stabil setelah *molecular dynamic*

Kata kunci: antivirus, dinamika molekul, *docking* molekul, katekin, SARS-CoV-2

Abstract

Coronavirus disease 19 (COVID-19) is a highly contagious disease caused by severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 (SARS-CoV-2). Natural compounds have been a cheaper and safer option. One of the examples of natural compounds that are efficacious as an antiviral is catechins. The catechin compound has antiviral activity against M-Protease SARS-CoV-2. However, its stability is not yet known in molecular dynamic simulations. The present research aimed to determine the best catechin compounds which have potential as anti-SARS-CoV-2 and determine their stability. This research was conducted using molecular docking and molecular dynamic methods. The results of molecular docking showed that catechin gallate and epicatechin gallate had the lowest binding affinity value namely -12.44 kcal/mol. The results of docking with molecular dynamics simulations showed the similarity of amino acids and hydrogen bonds. Thus, In sum, the catechin gallate and epicatechin gallate have the best activity against the target protein and were stable after molecular dynamics.

Keywords: antiviral, catechin, molecular docking, molecular dynamic, SARS-CoV-2